

Difusão anômala e equações generalizadas de difusão

(*Anomalous diffusion and generalized diffusion equations*)

Isabel Tamara Pedron¹ e Renio dos Santos Mendes²

¹Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Centro de Ciências Agrárias, Marechal Cândido Rondon, PR, Brasil

²Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Física, Maringá, PR, Brasil

Recebido em 25/10/2004; Aceito em 4/2/2005

Neste trabalho apresentamos um conjunto de equações generalizadas de difusão que podem descrever processos difusivos anômalos. Não-linearidade, dependência espacial e temporal nos coeficientes da equação e derivadas fracionárias, bem como uma combinação destas alternativas, são possíveis caminhos para generalizar a equação de difusão usual. Verificamos que a composição dos índices que caracterizam tais estratégias podem conduzir à superdifusão, subdifusão ou mesmo à difusão usual. Uma conveniente escolha dos coeficientes temporalmente dependentes também pode conduzir a estes processos. Esse procedimento amplia, portanto, o espectro de possibilidades na descrição de processos difusivos anômalos e representa um avanço formal na caracterização de tais processos.

Palavras-chave: difusão anômala, equações de difusão.

In this work we present a set of generalized diffusion equations that can describe anomalous diffusive processes. Nonlinearity, spatial and time-dependence in the coefficients and fractional derivatives, and combination of these alternatives as well, are some possible ways to generalize the usual diffusion equation. We verify that the composition of the indexes that characterize such strategies may conduct to subdiffusion, superdiffusion or even usual diffusion. A convenient choice of the time-dependent coefficients also leads to these processes. Thus, this procedure enlarges the spectrum of possibilities in the description of anomalous diffusive processes.

Keywords: anomalous diffusion, diffusion equations.

1. Introdução

A difusão é um fenômeno comum na natureza e ocorre, em geral, quando um sistema encaminha-se para o estado de equilíbrio. Em um processo de difusão num conjunto de elementos que se movem - energia, momento linear, átomos, moléculas, produtos químicos, células, animais, etc - cada elemento realiza uma trajetória randômica. Como resultado desse movimento individual altamente irregular, o conjunto se difunde. Num nível macroscópico, este comportamento coletivo, contrastando com o movimento individual microscópico, apresenta grande regularidade e segue leis dinâmicas bem definidas. A formulação estocástica destes fenômenos de transporte em termos de um caminho aleatório, bem como a descrição através da equação de difusão, são dois conceitos fundamentais na teoria de difusão em geral. Por outro lado, a dependência linear no crescimento temporal do deslocamento quadrático médio, $\langle x^2(t) \rangle \propto t$, ou, de forma equivalente, da variância, é uma característica do movimento browniano e, portanto, da difusão usual. Como tal, é uma consequência direta do teorema do limite cen-

tral e da natureza markoviana do processo estocástico subjacente [1]. Em contraste, a difusão anômala, em geral, tem como característica o crescimento não-linear da variância no decorrer do tempo, ou seja, a difusão será considerada anômala se houver desvio no comportamento enunciado anteriormente. Um marco no estudo da difusão anômala é o tratado de Richardson sobre difusão turbulenta, de 1926 [2]. Já no contexto da teoria de transportes, esse tipo de difusão tem sido mais largamente estudado desde o final da década de 60 e tem atraído a atenção de muitos pesquisadores nos últimos anos graças a sua universalidade na natureza. Em particular, ela joga um papel fundamental na análise de uma grande classe de sistemas tais como difusão em plasmas [3], difusão em fluidos turbulentos [4, 5], transporte de fluidos em meios porosos [6], difusão em fractais [7], difusão anômala em superfícies líquidas [8], análise de histogramas de batidas do coração em indivíduos saudáveis [9] e no estudo da energia vibracional em proteínas [10], entre outros sistemas físicos. Na descrição do comportamento anômalo, o crescimento da variância pode ser do tipo

¹E-mail: thamar@vn.com.br.

lei de potência, $\langle(\Delta x)^2\rangle \propto t^\eta$, ou apresentar outro padrão. Sob essa classificação, quando $\eta > 1$, temos um processo superdifusivo, $\eta < 1$, um processo subdifusivo e $\eta = 1$ descreve uma difusão normal. Além disso, num processo anômalo, a variância pode não ser finita, descrito como do tipo Lévy, embora apresente um índice bem definido que caracteriza tal processo. Em particular, manifestações anômalas causadas ou por distribuições largas (nas quais podem divergir o primeiro e o segundo momentos), ou por correlações de longo alcance, são significativas. A descrição deste tipo de processo se apóia na validade do teorema do limite central generalizado, de Lévy-Gnedenko, em que nem todos os momentos relacionados existem e a convolução da respectiva distribuição recai numa que tem como forma estável as distribuições de Lévy [11].

É possível simular o comportamento anômalo da difusão através de generalizações da equação de difusão ordinária. Isso pode ser feito introduzindo uma apropriada dependência temporal ou espacial nos coeficientes desta equação. É possível também a introdução de não-linearidades, estratégia que revelou-se frutífera na descrição de processos difusivos anômalos, e de derivadas fracionárias. Além disso, todos estes procedimentos podem ser efetuados simultaneamente. Cabe mencionar que caminhadas aleatórias, equação mestra e equações generalizadas de Langevin podem ser relacionadas à difusão anômala correlacionada (variância finita) e a de Lévy. Entretanto, o emprego de equações diferenciais parciais à descrição da difusão anômala proporciona um tratamento mais simples quando temos campos externos aplicados ao sistema, mantendo, de forma geral, todas as propriedades presentes nos formalismos acima.

Este trabalho tem como objetivo resgatar algumas destas equações generalizadas e sugerir outras, e está estruturado como segue. Na seção 2 apresentamos equações não-lineares e com dependência espacial no coeficiente de difusão. Na seção 3 procede-se da mesma forma, mas levando em conta agora a dependência temporal nos coeficientes da equação. Na seção seguinte é proposta uma equação não-linear que apresenta simultaneamente dependência espacial e temporal em seus coeficientes. Na quinta seção fazemos uma breve exposição de equações envolvendo derivadas fracionárias. Finalmente, na última seção apresentamos a conclusão e considerações finais.

2. Não-linearidade e dependência espacial no coeficiente de difusão

Iniciando nossa discussão, vamos considerar a equação de difusão anômala correlacionada,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho^\nu. \quad (1)$$

Também conhecida como equação de difusão em meios porosos [12], esta equação tem sido empregada para

modelar difusão em meios porosos [6], em plasma [3] e em dispersão espacial de populações biológicas [13], entre outros exemplos. Além disso, ela admite outras importantes aplicações físicas tais como percolação de gases através de meios porosos ($\nu \geq 2$) [14], filmes líquidos finos espalhando-se sob gravidade ($\nu = 4$) [15] e alguns fenômenos de auto-organização [16], entre outras. De um ponto de vista formal, citamos ainda a conexão com a termostatística não extensiva de Tsallis [17, 18, 19, 20].

Uma solução para a Eq. (1) é a gaussiana generalizada [18]

$$\rho(r, t) = \frac{1}{Z(t)} [1 - (1 - q) \beta(t) r^2]^{-\frac{1}{1-q}}, \quad (2)$$

sendo que $Z(t) \propto t^{d/[2+d(1-q)]}$, $\beta(t) \propto t^{-2/[2+d(1-q)]}$, $q = 2 - \nu$ e d é a dimensão espacial. No caso unidimensional, esta solução está representada na Fig. (1) para alguns valores de q com $Z(t) = 1$ e $\beta(t) = 1$.

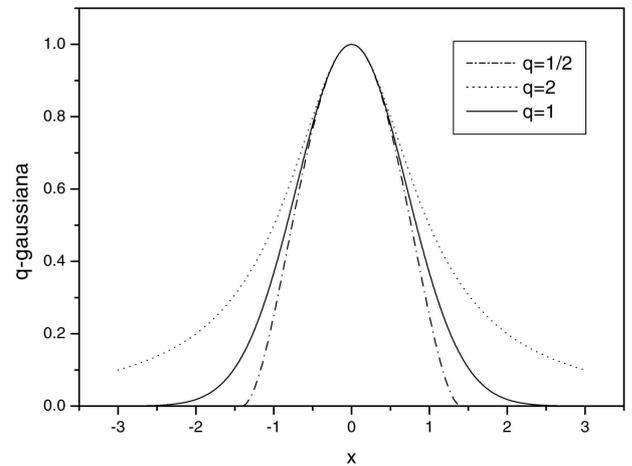


Figura 1 - A função gaussiana generalizada para valores típicos de q . Com $q = 1$ temos a gaussiana usual, para $q > 1$ tem-se cauda longa e largura grande, em comparação com a gaussiana usual, e $q < 1$ observa-se cauda curta e largura pequena, também em relação a gaussiana usual.

Quando $q \rightarrow 1$ ($\nu \rightarrow 1$) reobtemos a equação de difusão usual e a respectiva solução gaussiana. A depender do valor de q , verifica-se a forma curta ou longa da cauda da Eq. (2), quando comparada com a solução gaussiana. Quando $q < 1$, temos $\rho(r, t) = 0$ para $1 - (1 - q)\beta(t)r^2 < 0$, dando o comportamento de cauda curta para $\rho(r, t)$, implicando um corte em $r_0(t) = [(1 - q)\beta(t)]^{-1/2}$. Por outro lado, quando $q > 1$, o comportamento assintótico tipo lei de potência para a solução (2), $r^{-2/(q-1)}$, mostra que $\rho(r, t)$ é uma função de cauda longa, pois decai mais lentamente que uma gaussiana usual. Também motivada pela Fig. (1), pode ser conveniente a observação desse comportamento sob o enfoque da largura da gaussiana generalizada em comparação com a gaussiana usual. Ressalte-se que esta largura pode ser obtida a partir de $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$, porém divergindo para $q \geq 1 + 2/(2 + d)$, caso, por exemplo, da

lorentziana ($q = 2$). Uma medida do alargamento que não diverge, neste sentido mais apropriada que $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$, é a razão da largura a meia altura pela própria altura. Assim, no presente contexto, dizer cauda longa (curta) ou largura grande (pequena) são formas equivalentes de se referir à mesma situação.

O comportamento da cauda curta ou longa para $\rho(r, t)$ reflete-se diretamente no deslocamento quadrático médio, conduzindo a $\langle r^2 \rangle \propto t^{2/[2+d(1-q)]}$ quando finito. Novamente, comparada com a difusão usual (caso $q = 1$), temos uma superdifusão para $q > 1$ e subdifusão para $q < 1$.

Outro importante exemplo de difusão anômala está relacionado à difusão turbulenta na atmosfera. Uma contribuição pioneira para entender este fenômeno é o já mencionado trabalho de Richardson. Compilando um grande conjunto de dados experimentais, ele notou que a difusividade relativa de duas partículas cresce com a distância interpartículas. Denotando a distância interpartícula por r , Richardson sugeriu que a difusão relativa poderia ser descrita pela equação de difusão generalizada

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (K \nabla \rho), \quad (3)$$

ρ representando a probabilidade de que um par de partículas que foram soltas inicialmente juntas, na origem de um sistema de coordenadas, tenham uma separação interpartículas $r = |\mathbf{r}|$ no instante t . Aqui, $K = \epsilon r^{4/3}$ é a lei proposta por Richardson, a qual foi modificada por Hentshel e Procaccia, sob o argumento de que a difusividade é afetada pela natureza fractal da turbulência [21, 22]. A solução de (3) é dada por $\rho(t, r) \propto t^{-3/2} \exp[-9r^{2/3}/4\epsilon t]$ e o deslocamento quadrático médio é proporcional a t^3 , ou seja, um típico processo superdifusivo.

Seja, em um caso mais geral, a Eq. (3) em um espaço d -dimensional com $K \propto r^{-\theta}$, onde θ é um parâmetro real. Então, $\nabla \cdot (K \nabla)$ é proporcional a $r^{-(d-1)} \frac{\partial}{\partial r} r^{d-1-\theta} \frac{\partial}{\partial r} + A/r^{2-\theta}$ (A é um operador que depende das variáveis angulares) [25]. Conseqüentemente,

$$\tilde{\Delta} \equiv r^{-(d-1)} \frac{\partial}{\partial r} r^{d-1-\theta} \frac{\partial}{\partial r} \quad (4)$$

é a parte radial a ser considerada no estudo de soluções com simetria esférica da Eq. (3). Dada a forma do operador $\tilde{\Delta}$, não existem restrições quanto aos possíveis valores que d pode assumir. Dessa forma, d pode ser interpretada como uma dimensão fractal embebida em um espaço N -dimensional. Neste contexto, obtemos a equação de O'Shaughnessy-Procaccia,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \tilde{\Delta} \rho, \quad (5)$$

a qual tem sido usada para estudar difusão em fractais [23, 24]. Sua solução é dada por

$$\rho(r, t) = \frac{1}{Z(t)} e^{-\beta(t) r^{\theta+2}}. \quad (6)$$

Este *ansatz* substituído em (5) implica $Z(t) \propto t^{d/(\theta+2)}$ e $\beta(t) \propto t^{-1}$, apresentando um comportamento de cauda curta (longa) para $\theta > 0$ ($\theta < 0$), quando comparado com o caso gaussiano ($\theta = 0$). Por outro lado, o comportamento para o deslocamento quadrático médio é $\langle r^2 \rangle \propto t^{2/(\theta+2)}$. Logo, para $\theta > 0$ ($\theta < 0$) temos um regime subdifusivo (superdifusivo).

Ampliando a discussão, vejamos uma equação que apresenta simultaneamente a dependência espacial no coeficiente de difusão e a não-linearidade no termo difusivo. Essa perspectiva unificadora dá origem a novos comportamentos, os quais serão descritos por uma solução exata que interpola uma lei de potência com uma exponencial alongada [25]. Seja a equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (K \nabla \rho^\nu), \quad (7)$$

como uma unificação das Eqs. (1) e (3). De fato, a Eq. (7) reduz-se a uma difusão anômala correlacionada (1) se $K = D$, e à equação de Richardson (3) se $\nu = 1$ e $K \propto r^{4/3}$. É possível avançar mais nesta generalização centrado a atenção na equação radial

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \tilde{\Delta} \rho^\nu, \quad (8)$$

onde foi empregado $K = D r^{-\theta}$. O uso dessa equação, ao invés da Eq. (7), permite-nos analisar casos com d não inteiro e, a exemplo da equação de O'Shaughnessy-Procaccia, relacionar d com uma dimensão fractal e recuperando esta última quando $\nu = 1$. Agora o *ansatz* para resolver a Eq. (8) é da forma

$$\rho(r, t) = \frac{1}{Z(t)} [1 - (1 - q) \beta(t) r^\lambda]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (9)$$

se $1 - (1 - q)\beta(t)r^\lambda \geq 0$ ou $\rho(r, t) = 0$ se a desigualdade for invertida e com $\lambda = 2 + \theta$ [25]. As funções $\beta(t)$ e $Z(t)$ são dadas por

$$\beta(t) = \beta_0 [1 + At]^{-\lambda/[\lambda+d(1-q)]} \quad (10)$$

e

$$Z(t) = Z_0 [1 + At]^{d/[\lambda+d(1-q)]}, \quad (11)$$

com

$$A = D \lambda (2 - q) [\lambda + d(1 - q)] \beta_0 Z_0^{q-1}, \quad (12)$$

$\beta_0 = \beta(0)$ e $Z_0 = Z(0)$. Para o deslocamento quadrático médio temos

$$\langle r^2 \rangle \sim t^{2/[2+\theta+d(\nu-1)]} \quad (13)$$

para t suficientemente longo. É fácil verificar que $\theta = d(1 - \nu)$ descreve uma difusão normal ($\langle r^2 \rangle \propto t$), mesmo quando $\theta \neq 0$ e $\nu \neq 1$. De fato, existe uma competição entre θ e ν , de tal forma que o regime de difusão anômala induzido por $\theta \neq 0$ é compensado por um conveniente com $\nu \neq 1$. Além disso, essa competição leva

a um processo subdifusivo quando $\theta > d(1 - \nu)$ e a um superdifusivo quando $\theta < d(1 - \nu)$.

Pode-se também introduzir termos de fonte e de arraste na Eq. (8), bem como obter sua solução estacionária quando um termo de arraste independente do tempo está presente [26].

3. Equações com coeficientes dependentes do tempo

A dependência temporal nos coeficientes da equação de difusão também pode induzir comportamento anômalo, seja a equação linear ou não. Iniciemos com o movimento browniano de uma partícula, a qual está sujeita a um potencial harmônico dependente do tempo $U(x, t) \sim k(t)x^2$ [27]. A equação de Fokker-Planck unidimensional associada ao processo é a equação linear

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} [k(t)x\rho], \quad (14)$$

sendo que o caso $k(t) = cte$ corresponde ao processo de Ornstein-Uhlenbeck. Seguindo um procedimento diferente do apresentado em [27] vamos propor como solução de (14) a gaussiana

$$\rho(x, t) = \frac{1}{Z(t)} e^{-\beta(t)[x-x_0(t)]^2}, \quad (15)$$

e obtemos então para $\beta(t)$, $Z(t)$ e $x_0(t)$ as equações

$$x_0(t) = x_0 e^{-\int_0^t k(t') dt'} \quad (16)$$

$$\beta(t) = \beta_0 [1 - 2f(t)]^{-1} \quad (17)$$

$$Z(t) = Z_0 [1 - 2f(t)]^{1/2}. \quad (18)$$

A função $f(t)$ é expressa como

$$f(t) = e^{-2 \int_0^t k(t') dt'} \left[\int_0^t [k(t') - 2D\beta_0] e^{2 \int_0^{t'} k(t'') dt''} dt' \right].$$

Mesmo restringindo a análise ao caso particular em que o termo de arraste apresenta comportamento temporal do tipo $k(t) \sim kt^{-b}$, para grandes valores de t , vários resultados são apresentados. Verificamos primeiramente a forma geral da variância

$$\sigma^2 = \frac{\int (x - x_0)^2 \rho(x, t) dx}{\int \rho(x, t) dx} \propto \beta^{-1}. \quad (19)$$

Para valores de b tais que $b > 1$, verifica-se que $\sigma^2 \propto t$, ou seja, o processo é difusivo com a variância crescendo linearmente com o tempo para qualquer valor de k . Resultado esperado, uma vez que, para tempos suficientemente longos, o termo de arraste contendo $k(t)$ tende a zero e um processo de Wiener emerge. Por outro lado, vejamos por exemplo a região com $b = 1$. Nesse caso,

$\sigma^2 = \frac{2D}{2k+1}t$ para $k > -1/2$, isto é, um comportamento linearmente difusivo. Porém, para $k = -1/2$, verifica-se que $\sigma^2 \propto t \ln t$ e, finalmente, para $k < -1/2$, obtemos $\sigma^2 \sim t^{2|k|}$, já caracterizando processos anômalos. Quando b assume valores no intervalo $0 < b < 1$, segue que, quando $k > 0$ a variância cresce como $\sigma^2 \sim t^b$, num característico processo subdifusivo e se $k < 0$, a variância cresce como uma exponencial alongada. Para $b < 0$, o termo de arraste apresenta uma contribuição que cresce com o tempo e eventualmente pode divergir. Para $k < 0$, o crescimento da variância é mais que exponencialmente difusivo. No caso de $k > 0$, temos $\sigma^2 \sim 1/t^{|b|}$, decrescendo como uma lei de potência.

Analisando os resultados acima, podemos concluir que, na presença de coeficientes dependentes do tempo, um processo gaussiano não implica necessariamente uma difusão usual, ou, em outras palavras, uma variedade de regimes difusivos anômalos podem surgir mesmo para um processo difusivo descrito por uma distribuição gaussiana.

Vamos rever agora uma grande classe de difusão anômala oriunda da equação de Fokker-Planck não-linear N -dimensional

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = \mathcal{D}(t) \nabla^2 [\rho(\mathbf{r}, t)]^\nu - \nabla \cdot [\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t)] - \alpha(t) \rho(\mathbf{r}, t), \quad (20)$$

na qual é incorporada a dependência temporal na força externa $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{k}_1(t) + k_2(t)\mathbf{r}$, no coeficiente de difusão $\mathcal{D}(t)$ e no termo de fonte $\alpha(t)$ [28].

O termo de fonte em (20) pode ser removido através de uma mudança na solução do tipo

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \exp \left[- \int_0^t \alpha(t') dt' \right] \hat{\rho}(\mathbf{r}, t). \quad (21)$$

Assim, $\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)$ obedece à equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) = D(t) \nabla^2 [\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)]^\nu - \nabla \cdot [\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \hat{\rho}(\mathbf{r}, t)], \quad (22)$$

com $D(t) = \mathcal{D}(t) \exp \left[(1 - \nu) \int_0^t \alpha(t') dt' \right]$. A dependência temporal adicional no coeficiente de difusão desaparece no caso linear ($\nu = 1$).

A solução exata da Eq. (22), com a força externa dada acima, é obtida empregando o *ansatz*

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{Z(t)} \left[1 - (1 - q)\beta(t) (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t))^2 \right]^{1/(1-q)}.$$

Segue que esta última equação é uma solução da Eq. (22) quando $\nu = 2 - q$ e as funções $\beta(t)$, $Z(t)$, $\mathbf{r}_0(t) = \sum_{i=1}^N x_{0i}(t) \mathbf{e}_i$ são dadas por

$$x_{0i}(t) = e^{-M(t)} \left[x_{0i}(0) + \int_0^t k_{1i}(t') e^{M(t')} dt' \right], \quad (23)$$

com $M(t) = \int_0^t k_2(t') dt'$. Ainda, com $\beta(0) = \beta_0$ e $Z(0) = Z_0$ temos

$$Z(t) = Z_0 \left[1 - \frac{c}{N} f(t) \right]^{N/c} \tag{24}$$

e

$$\beta(t) = \beta_0 \left[1 - \frac{c}{N} f(t) \right]^{-2/c}, \tag{25}$$

onde $c = 2 + N(1 - q)$ e

$$f(t) = e^{-cM(t)} \times \int_0^t \left[Nk_2(t') - 2N(2 - q)\beta_0 Z_0^{q-1} D(t') \right] e^{cM(t')} dt'.$$

Também aqui é interessante investigar o comportamento assintótico temporal da variância $\sigma^2 \propto \beta^{-1}$. Pode-se considerar uma dependência temporal da força harmônica externa dada por $k_2(t) = k t^{-b}$, o coeficiente de difusão $\mathcal{D}(t) = D_0 t^d$ e $\alpha(t) = \alpha_0 t^a$ [28]. Conforme a combinação dos valores das constantes e dos respectivos índices, uma ampla classe de processos difusivos pode ser descrita. Em outras palavras, os resultados indicam que a anomalia em processos difusivos pode aparecer como consequência de diferentes causas. Em particular, a combinação de não-linearidade e dependência temporal nos coeficientes pode levar à difusão normal (crescimento linear no tempo do deslocamento quadrático médio). Assim, mesmo processos descritos por distribuições não-gaussianas podem levar a esse tipo de difusão. Esse fato implica que a difusão normal, em geral, não pode ser associada com o perfil gaussiano da distribuição $\rho(\mathbf{r}, t)$, isto é, o crescimento linear da variância não necessariamente significa que estamos na presença de difusão ordinária (no sentido da equação usual).

4. Equação não-linear com dependência espacial e temporal nos coeficientes

Seguindo a linha de discussão apresentada nas seções anteriores vamos propor agora a equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \mathcal{D}(x, t) \frac{\partial \rho(x, t)^\nu}{\partial x} - \mathcal{F}(x, t) \rho(x, t) \right\}. \tag{26}$$

Aqui é assumida a dependência espacial e temporal tanto no coeficiente de difusão como na força, escritos como

$$\mathcal{D}(x, t) = D(t)x^{-\theta} \quad \text{e} \quad \mathcal{F}(x, t) = -k(t)x. \tag{27}$$

Em vez de introduzir um *ansatz* específico, como nas seções anteriores, vamos considerar um procedimento

mais geral, inclusive pelo qual os resultados anteriores podem ser obtidos. Nesse sentido, para resolver a Eq. (26) será usada uma função escalada do tipo

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\Phi(t)} \tilde{\rho} \left[\frac{x}{\Phi(t)} \right]. \tag{28}$$

Procedimento similar tem sido empregado, por exemplo, em [29, 30]. Via de regra, o preço que se paga com a introdução desse *ansatz* é ter que resolver uma equação diferencial a mais, que pode ser não-linear. A substituição de (28) em (26), levando em conta (27) e considerando $z = x/\Phi(t)$, conduz a

$$-\frac{\Phi^{\theta+\nu+1}}{D(t)} \left(\frac{1}{\Phi} \frac{d\Phi}{dt} + k(t) \right) \frac{\partial}{\partial z} [z\tilde{\rho}(z)] = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ z^{-\theta} \frac{\partial}{\partial z} [\tilde{\rho}(z)^\nu] \right\}.$$

A seguir, eliminamos a dependência temporal explícita nessa última equação escolhendo

$$\tilde{k} = \frac{\Phi^{\theta+\nu+1}}{D(t)} \left(\frac{1}{\Phi} \frac{d\Phi}{dt} + k(t) \right), \tag{29}$$

onde \tilde{k} é uma constante e segue então que

$$-\tilde{k} \left[\frac{d}{dz} z\tilde{\rho}(z) \right] = \frac{d}{dz} \left\{ z^{-\theta} \frac{d}{dz} [\tilde{\rho}(z)^\nu] \right\}. \tag{30}$$

Através de uma integração obtemos

$$-\tilde{k} z\tilde{\rho}(z) = z^{-\theta} \frac{d}{dz} [\tilde{\rho}(z)^\nu] + C,$$

e assumindo $C = 0$, com $\tilde{\rho}(0) = \tilde{\rho}_0$, resulta

$$\tilde{\rho}(z) = \tilde{\rho}_0 [1 - az^{\theta+2}]^{1/(\nu-1)}, \tag{31}$$

sendo

$$a = \frac{(\nu-1)\tilde{k}}{\nu(\theta+2)\tilde{\rho}_0^{\nu-1}}. \tag{32}$$

Por outro lado, de (29), escrevemos

$$\frac{d\Phi}{dt} + k(t)\Phi = \tilde{k}D(t)\Phi^{-(\theta+\nu)}. \tag{33}$$

Propondo uma solução do tipo

$$\Phi(t) = \Phi_0 [1 + f(t)]^n,$$

a qual, substituída em (33), conduz a

$$n \frac{df(t)}{dt} + k(t)f(t) = \tilde{k}D(t) - k(t),$$

onde $n = \frac{1}{\theta+\nu+1}$. A solução desta última equação é dada por

$$f(t) = (\theta + \nu + 1)e^{-\mu(t)} \int_0^t [\tilde{k}D(t') - k(t')] e^{\mu(t')} dt' \tag{34}$$

com

$$\mu(t) = (\theta + \nu + 1) \int_0^t k(t') dt'.$$

Interessante notar que $\Phi(0) = \Phi_0 \neq 0$ significa que $\rho(x, 0)$ tem uma largura inicial não nula.

Assintoticamente a variância se comporta como

$$\sigma^2 \propto \Phi^2 \propto [1 + f(t)]^{\frac{2}{\theta + \nu + 1}}. \quad (35)$$

Para analisar esse comportamento é preciso conhecer a forma das funções $D(t)$ e $k(t)$. Podemos considerar alguns casos particulares, como por exemplo $k(t) = 0$ e $D(t) = cte$. Nesse caso, $f(t) \propto t$ e $\sigma^2 \propto t^{\frac{2}{\theta + \nu + 1}}$, recuperando os resultados da seção 2 (em uma dimensão). Acrescentando $\nu = 1$ obtemos os resultados de Procaccia para a difusão em fractais, $\sigma^2 \propto t^{\frac{2}{2+\theta}}$ e, evidentemente, se $\theta = 0$ o comportamento típico da difusão usual se manifesta.

Outra possibilidade é considerar $k(t) = 0$ e $D(t) = D_0 t^d$. Nesse caso $f(t) \propto t^{d+1}$ e $\sigma^2 \propto t^{\frac{2(d+1)}{\theta + \nu + 1}}$. Então $2(d+1) > \theta + \nu + 1$ descreve uma superdifusão, $2(d+1) < \theta + \nu + 1$ subdifusão e $2(d+1) = \theta + \nu + 1$ caracterizará uma difusão normal. É possível também simular comportamentos explorando modelos para a força de arraste. Por exemplo, $D(t) = cte$ e $k(t) = ct^{-b}$. Se $b < 1$ e $c > 0$ temos $\sigma^2 \propto t^{\frac{2b}{\theta + \nu + 1}}$ e $\sigma^2 \propto e^{2|c| \frac{t^{1-b}}{1-b}}$ se $c < 0$. Por outro lado, se $b > 1$ implica $\sigma^2 \propto t^{\frac{2}{\theta + \nu + 1}}$, o termo de arraste vai a zero e a difusão usual é recuperada se $\theta = 0$ e $\nu = 1$. A inclusão de um termo de fonte em (26) pode ser tratada da mesma forma que na seção anterior, alterando apenas a forma de $D(t)$.

5. Difusão anômala e equações fracionárias

De forma geral, a difusão usual é descrita por um modelo local, ou seja, em pequenas escalas de tempo a evolução da função densidade em uma dada posição é afetada apenas por pontos próximos no espaço. Em alguns casos, porém, essa suposição não se aplica, levando a inconsistências na definição do coeficiente de difusão [31]. Dito de outra maneira, mesmo em pequenas escalas de tempo a evolução da função densidade em uma dada posição pode ser afetada por pontos distantes no espaço, caso, por exemplo, do transporte turbulento na camada limite convectiva [32]. Uma ferramenta que pode ser usada para descrever esta última classe de fenômenos é baseada no cálculo fracionário, no qual operadores diferenciais não locais podem ser empregados para levar em conta as correlações espaciais. Este procedimento, que leva à equações de difusão fracionárias, tem sido amplamente investigado para descrever difusão anômala [33]. As equações de difusão fracionárias são frequentemente consideradas como um procedimento alternativo para modelos de caminhada

aleatória com tempo contínuo, equações de Langevin generalizadas ou equações mestra generalizadas. Assim, equações de difusão fracionárias, ou equações de Fokker-Planck fracionárias, têm sido consideradas por diversos autores com diferentes propósitos, seja com derivadas fracionárias temporais [34, 35], com derivadas fracionárias espaciais [36, 37, 38] ou mesmo incluindo derivadas fracionárias temporais e espaciais [39, 40, 41].

Um exemplo típico de equação de difusão fracionária espacial é dado por

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = K_\mu \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \rho(x, t), \quad (36)$$

que tem como solução as distribuições de Lévy

$$L_\mu(|x|, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp[-ikx - K_\mu |k|^\mu t], \quad (37)$$

sendo K_μ uma constante. Estas distribuições não possuem segundo momento finito e caracterizam a difusão anômala do tipo Lévy.

Além de derivadas fracionárias podemos generalizar ainda mais a equação de difusão acrescentando não-linearidade e dependência espacial no coeficiente de difusão, ou mesmo um termo de arraste, ou seja

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ D(x) \frac{\partial^\mu}{\partial x^\mu} [\rho(x, t)]^\nu - F(x) \rho(x, t) \right\}, \quad (38)$$

onde $\nu, \mu \in \mathcal{R}$, $D(x) \propto |x|^{-\theta}$ e $F(x) = -dV(x)/dx$ é uma força externa associada ao potencial $V(x)$. Por exemplo, para $\mu = 1$ e $\nu = 1$, a Eq. (38) recupera a equação de Fokker-Planck usual com um termo de arraste. O caso $\mu < 1$ com $F(x) = 0$ e $D = cte$ foi tratado em [38]. Também o caso com $F(x) = 0$, porém com $D(x) \propto x^{-\theta}$ e vários valores de μ é apresentado em [42]. Quanto à derivada fracionária, estamos usando a definição de Riemann-Liouville

$${}_0 D_x^\alpha f(x) = \frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_0^x dt \frac{f(t)}{(x - t)^{1 + \alpha - n}},$$

onde $(n - 1 \leq \alpha < n)$ [43].

Para um arraste linear do tipo $F = -k_1 x$ a solução de (38) é obtida em [44] e escrita como

$$\rho(x, t) = \frac{A}{\Phi(t)} \left[\frac{z^{(\mu+\theta)(1+\mu+\theta)}}{(1+bz)^{(1-\mu)(1+\mu+\theta)}} \right]^{\frac{1}{1-2\mu-\theta}}, \quad (39)$$

lembrando que $z = x/\Phi(t)$ e ainda

$$A = \left[\frac{\Gamma(-\beta)}{\Gamma(\alpha + 1)} \right]^{\frac{1+\mu+\theta}{1-2\mu-\theta}}. \quad (40)$$

Nesta última expressão \bar{k} é uma constante arbitrária. Por outro lado, $\Phi(t)$ apresenta a forma

$$\Phi(t) = \left\{ \bar{k}_2 e^{-\delta k_1 t} - \frac{\bar{k}'}{k_1} [1 - e^{-\delta k_1 t}] \right\}^{1/\delta}, \quad (41)$$

na qual \bar{k}_2 é outra constante arbitrária e $\delta = \nu + \mu + \theta - 1$.

Empregando-se uma força externa mais geral, do tipo $F = -k_1 x + \bar{k}_\gamma x |\gamma|^{-1}$, as soluções podem ser encontradas para particulares valores de μ [44]. Portanto, a Eq. (38) pode ser usada para descrever uma ampla classe de processos de difusão anômala, visto que ela contém, como um caso particular, a equação para meios porosos, superdifusão de Lévy, bem como uma mistura de ambas. Também vale notar que a introdução de um termo de fonte (não-dependente do tempo) em (38) não altera a parte da solução dependente de z , sendo modificada somente a parte que depende explicitamente de t .

6. Conclusão

A generalização da equação de difusão usual, seja através da introdução de não-linearidades ou dependência espacial e temporal nos coeficientes de difusão, seja através de derivadas fracionárias, ou mesmo uma combinação destas estratégias, representa um avanço na descrição formal dos processos difusivos bem como nas suas possíveis soluções. Nesta direção, as equações apresentadas aqui ampliam o espectro de possibilidades na caracterização de processos difusivos anômalos e interpolam outras equações de consagrada posição na literatura. Espera-se, portanto, que estas equações, ou pelo menos casos especiais delas, reflitam situações físicas nas quais haja competição entre diferentes mecanismos que geram difusão anômala.

Referências

- [1] S.K. Ma, *Statistical Mechanics* (World Scientific, Singapore, 1985).
- [2] L.F. Richardson, Proc. R. Soc. London Ser. A **110**, 709 (1926).
- [3] J.G. Berryman, J. Math. Phys. **18**, 2108 (1977).
- [4] M.F. Shlesinger, J. Klafter e B.J. West, Physica A **140**, 212 (1986).
- [5] M.F. Shlesinger, B.J. West e J. Klafter, Phys. Rev. Lett. **58**, 1100 (1987).
- [6] H. Spohn, J. Phys. I (France) **3**, 69 (1993).
- [7] J. Stephenson, Physica A **222**, 234 (1995).
- [8] O.V. Bychuk e B. O'Shaughnessy, Phys. Rev. Lett. **74**, 1795 (1995).
- [9] C.-K. Peng, J. Mietus, J.M. Hausdorff, S. Havlin, H.E. Stanley e A.L. Goldberger, Phys. Rev. Lett. **70**, 1343 (1993).
- [10] X. Yu e D.M. Leitner, J. Chem. Phys. **119** (23), 12673 (2003).
- [11] J.P. Bouchad e A. Georges, Phys. Rep. **195**, 127 (1990).
- [12] D.G. Aronson, Lecture Notes in Mathematics **1224**, 1 (1986).
- [13] M.E. Gurtin e R.C. Mac Camy, Math. Biosciences **33**, 35 (1977).
- [14] M. Muskat, *The Flow of Hogeneous Fluids Through Porous Media* (McGraw-Hill, New York, 1937).
- [15] J. Buckmaster, J. Fluid Mech. **81**, 735 (1977).
- [16] J.M. Carlson, E.R. Grannan, C. Singh e G.H. Swindle, Phys. Rev. E **48**, 688 (1993).
- [17] A.R. Plastino e A. Plastino, Physica A **222**, 347 (1995).
- [18] C. Tsallis e D.J. Buckman, Phys. Rev. E **54**, R2197 (1996).
- [19] L. Borland, Phys. Rev. E **57**, 6634 (1998).
- [20] L. Borland, F. Pennini, A.R. Plastino e A. Plastino, Eur. Phys. J. B **12**, 285 (1999).
- [21] H.G.E. Hentschel e I. Procaccia, Phys. Rev. A **27**, 1266 (1983).
- [22] H.G.E. Hentschel e I. Procaccia, Phys. Rev. A **29**, 14261 (1984).
- [23] B.O. Shaughnessy e I. Procaccia, Phys. Rev. Lett. **54**, 455 (1985).
- [24] B.O. Shaughnessy e I. Procaccia, Phys. Rev. A **32**, 3073 (1985).
- [25] L.C. Malacarne, R.S. Mendes, I.T. Pedron e E.K. Lenzi, Phys. Rev. E **63**, 030101(R) (2001).
- [26] I.T. Pedron, R.S. Mendes, L.C. Malacarne e E.K. Lenzi, Phys. Rev. E **65**, 41108 (2002).
- [27] F. Lillo e R.N. Mantegna, Phys. Rev. E **61**, R4675 (2000).
- [28] L.C. Malacarne, R.S. Mendes, I.T. Pedron e E.K. Lenzi, Phys. Rev. E **65**, 52101 (2002).
- [29] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transition and Renormalization Group* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1992).
- [30] C. Tsallis, Physica A **221**, 227 (1995).
- [31] P. Paradisi, R. Cesari, F. Mainardi e F. Tampieri, Physica A **293**, 130 (2001).
- [32] B.L. Sawford e F.M. Guest, J. Atmos. Sci. **44**, 1152 (1987).
- [33] R. Metzler e J. Klafter, Physiscs Reports **339**, 1 (2000).
- [34] F. Mainardi, Chaos Solitons Fractals **7**, 1461 (1996).
- [35] R. Metzler, W.G. Glöckle e T.F. Nonnenmacher, Physica A **211**, 13 (1994).
- [36] B.J. West e V. Seshadri, Physica A **113**, 203 (1982).
- [37] R. Gorenflo, G. Fabritis e F. Mainardi, Physica A **269**, 79 (1999).
- [38] M. Bologna, C. Tsallis e P. Grigolini, Phys. Rev. E **62**, 2213 (2000).
- [39] B.J. West, P. Grigolini, R. Metzler e T.F. Nonnenmacher, Phys. Rev. E **55**, 99 (1997).
- [40] A.J. Saichev e G.M. Zaslavsky, Chaos **7**, 753 (1997).

- [41] R. Metzler e T.F. Nonnenmacher, *Chem. Phys.* **284**, 67 (2002).
- [42] C. Tsallis e E.K. Lenzi, *Chem. Phys.* **284**, 341 (2002).
- [43] K.B. Oldham e J. Spanier, *The Fractional Calculus* (Academics Press, New York, 1974).
- [44] E.K. Lenzi, R.S. Mendes, L.C. Malacarne e I.T. Pedron, *Physica A* **319**, 245 (2003).